

OTKA témapályázat zárójelentése

# Európai Graduális Kollégium

Tudományterület: **Szilárdtestfizika**  
OTKA nyilvántartási szám: **NDF 45172**  
Témavezető: **Virosztek Attila**, a fizikai tudomány doktora  
Kutatóhely: **BME, Fizika Tanszék**  
A kutatás időtartama: **2003-2006**  
Az OTKA támogatás összege: **24.5 MFt**

## Tartalomjegyzék

|  |          |
|--|----------|
| <b>1. A pályázat célja</b>                               | <b>2</b> |
| <b>2. Az elért eredmények</b>                            | <b>3</b> |
| 2.1. Elektron spin rezonancia szilárdtestekben . . . . . | 3        |
| 2.2. Waveletek és változó felbontású analízis . . . . .  | 3        |
| 2.3. Amorf félvezetők növekedési modelljei . . . . .     | 4        |
| 2.4. Nemkonvencionális sűrűség hullámok . . . . .        | 5        |
| <b>3. Kiegészítő információk</b>                         | <b>7</b> |

## 1. A pályázat célja

Az OTKA támogatás célja a Budapest-Marburg nemzetközi doktori (PhD) iskola (Európai Graduális Kollégium, újabb nevén IRTG, azaz International Research Training Group) magyar oldalán felmerülő költségek részbeni finanszírozása volt. A marburgi (Németország) Philipps Egyetem Fizika Tanszéke és a BME Fizikai Intézete, valamint az MTA Szilárdtestfizikai és Optikai Kutatóintézete vezető kutatói részvételével működtetett közös doktori iskolát német oldalról a DFG támogatja 2011-ig. Az iskola kutatási területeiről, a két oldal közös programjairól, valamint a résztvevő hallgatókról és témavezetőkről részletes információk találhatóak az iskola honlapján:

<http://www.physik.uni-marburg.de/de/forschung/forschungseinrichtungen/electron-electron-interactions-in-solids/home.html>.

Az OTKA támogatást a közös doktori iskola két magyar PhD hallgatójának ösztöndíjára fordítottuk a futamidő alatt. A hallgatók személye évről évre változott, így a jelen beszámoló az aktuális hallgatóknak megfelelően az iskola négy kutatási területét érinti (zárójelben a kutatást végző PhD hallgató neve, és az ösztöndíjjal támogatott kutatás tanéve):

- Elektron spin rezonancia szilárdtestekben  
(Murányi Ferenc, 2003/2004),
- Waveletek és változó felbontású analízis  
(Nagy Szilvia, 2004/2005),
- Amorf félvezetők növekedési modelljei  
(Lukács Rozália, 2005/2006),
- Nemkonvencionális sűrűség hullámok  
(Ványolos András, 2003/2006).

Támogatott hallgatóink közül PhD fokozatot szerzett Murányi Ferenc és Nagy Szilvia 2005-ben, míg Ványolos András PhD védése 2007 folyamán várható. Lukács Rozália jelenleg másodéves PhD hallgató. A 2006-os év utolsó négy hónapjában ösztöndíjat kapott még Romhányi Judit elsőéves PhD hallgatónk. Éppen hogy elkezdett munkájából publikáció még nem született, így témája nem szerepel ebben a záróbeszámolóban. A továbbiakban a kutatási eredményeket a fenti témák szerint csoportosítva ismertetjük. A szövegben megadott referenciák a publikációs lista megfelelő elemére vonatkoznak.

## 2. Az elért eredmények

### 2.1. Elektron spin rezonancia szilárdtestekben

A 2003-as év során építettünk egy nagyterű, longitudinálisan detektált elektron spin rezonancia berendezést (LOD-ESR), mely 35 és 75 GHz-en működik. Mivel nincs a rendszerben rezonáns mikrohullámú alkatrész, ez azt eredményezi, hogy több mikrohullámú frekvencián lehet mérni a mérőfej cseréje nélkül. Az alacsony zajú rádiófrekvenciás detektálás kompenzálja a rezonáns mikrohullámú elemek hiányából adódó alacsony érzékenységet. A LOD-ESR spektrométer fő elemei kereskedelmi forgalomban kaphatóak, ezáltal a módszer bármely nagyfrekvenciás spektrométerhez adaptálható. A berendezés segítségével lehetővé válik a spin-rács relaxációs idő ( $T_1$ ) hőmérséklet és mágneses tér függő viselkedésének tanulmányozása. A mért LOD-ESR spektrumból meghatározható a  $T_1$ , a működési tartomány 2 és 80 ns közé esik. A berendezés működését a  $\text{RbC}_{60}$  fullerid polimeren végzett méréseken keresztül demonstráltuk [7].

Kifejlesztettünk egy 3, illetve 9 GHz-en működő ESR spektrométert is, mely egy 9 T szupravezető mágnesben található. A mérőfej tartalmaz egy ún. LGR üreget (loop gap resonator). A berendezés a 0-9 T mágneses tér és 1.5-400 K-es hőmérsékleti tartományban működik. A berendezés segítségével lehetővé válik olyan rezonancia jelenségek tanulmányozása melyek messze vannak a  $g = 2$  feltételtől, pl. antiferromágnesek esetén. Az üreg alacsony jósági tényezője miatt lehetőségünk van impulzus módszerek alkalmazására, mint pl. a fentebb ismertetett LOD-ESR. A berendezés működését a  $\text{NaNiO}_2$  antiferromágnesen, a  $\text{MgB}_2$  szupravezetőn és a  $\text{RbC}_{60}$  fullerid polimeren végzett méréseken keresztül mutattuk be [14].

### 2.2. Waveletek és változó felbontású analízis

A változó felbontású analízis (multiresolution analysis, MRA) vagy wavelet analízis alkalmazásával a függvényeket – így az elektronsűrűséget, vagy a hullámfüggvényt – különböző finomságú felbontási szinteken lehet kezelni és közelíteni. A felbontásnak nem kell minden pontban azonosnak lenni, a függvények részletgazdag helyein (mint például az elektronsűrűségnek az atommagok helyén fellépő csúcsainál) lokálisan sokkal finomabb felbontás is alkalmazható, mint a sima, lassan változó részeknél. Ha a sűrűségfüggvény elméletből ismert egy- és kételektron-sűrűségmátrixok wavelet alapú kifejté-

sét alkalmazzuk, a kinetikus és az elektron-elektron kölcsönhatási energia kifejezésekor fellépő kételektron-integrál jellegű tagok univerzálisak, rendszertől függetlenek lesznek, akár táblázatban is kezelhetők. A sűrűség kifejtésének lokális finomítása során egy és három dimenzióban a szükséges waveletek száma a rendszám logaritmusával skálázódik. A kételektron sűrűségmátrixok MRA-együtthatóira vonatkozó viszonylag egyszerű feltétel teljesítésével reprodukálni lehet a szokásos módszerekkel oly nehezen visszaadható elektron-elektron csúcsfeltételt is [16].

A waveletek és az MRA lehetőséget biztosítanak arra, hogy egy függvény különböző térbeli darabjait egyszerre különböző felbontással kezeljük. Az atommagok környékén elég nagy felbontás szükséges, az aszimptotikus régiókban már akár 1-0,5 atomi egységes rácson vett waveletekkel is jól vissza lehet adni a sűrűséget, míg a kötések helyein ennél néhány felbontási szinttel finomabb reprezentáció szükséges. Megállapítottuk, hogy az atomi rendszerek elektronsűrűségének kifejtéséhez szükséges waveletek száma 1, 2 és 3 dimenzióban is az elektronok számának logaritmusával skálázódik [15].

Az MRA-nak, mint elvi lehetőségnek a numerikus számításokban való alkalmazhatóságát részleteiben is megvizsgáltuk. A wavelet analízis alkalmazásával egy egyszerű modell rendszer, a harmonikus oszcillátor wavelet együtthatóinak viselkedését tanulmányoztuk. Meghatároztuk, hogy a különböző felbontási szintű megoldások mennyire pontosan közelítik az egzakt eredményeket. Megmutattuk, hogy a numerikus számításokban elkerülhető az a potenciális veszély, hogy a felhasznált bázisfüggvények száma a felbontás finomságával exponenciálisan skálázódjon. Feltérképeztük, hogy milyen trajektóriát járnak be a lényeges wavelet együtthatók a maximális felbontás növelése során. Kidolgoztunk egy olyan adaptív eljárást is, amely képes megadni, hogy melyek a fontos együtthatók az adott szinten, anélkül, hogy az összes (nem lényeges) együtthatót ki kellene számítani [19].

### 2.3. Amorf félvezetők növekedési modelljei

Ezirányú kutatásaink középpontjában az amorf félvezetők álltak, ezen belül a kalkogén üvegek, amelyek modell anyaga a szelén. Japán kutatók kísérletileg amorf szelén vékonyrétegeket növesztettek különböző beesési szögek alatt ( $0^\circ$ ,  $80^\circ$ ). Azt tapasztalták, hogy különböző szerkezetek alakultak ki. Fénnyel történt megvilágítás hatására a  $0^\circ$  beesési szögű minták térfogata nőtt, a ferde beesési szögűeké pedig csökkent. A feladat az volt, hogy molekuladinamikai szimulációval különböző beesési szögek alatt ( $0^\circ$ ,  $20^\circ$ ,  $45^\circ$ ,  $60^\circ$ ) amorf szelén

vékonyrétegeket növekszünk, részletesen megvizsgáljuk az így kialakult szerkezeteket, majd magyarázatot találunk az eltérő térfogatnövekedés okára. A szerkezetvizsgálat során számítógépes programokat írtunk, amelyekkel sikerült feltérképezni a minták radiális sűrűségeloszlás-függvényét, sűrűségét, koordinációs szám eloszlását, a kötéstávolság eloszlást, a gyűrűeloszlást, valamint a mintában található "lyukak" nagyságát. Ez utóbbira azért volt szükség, mert feltételezéseink szerint a kisebb beesési szög alatt növesztett minták sűrűbbek, kevesebb "lyuk" alakul ki ezekben a szerkezetekben, és így fény hatására ezek a minták kitágulnak. A ferde szög alatt növesztett szerkezetek nagyobb "lyukakat" tartalmaznak, amelyek a megvilágítás alatt összeesnek, összehúzódnak. A vizsgálatainkból megállapítottuk, hogy ha növeljük az atomok beesési szögét, a minták sűrűsége csökken, nagyobb "lyukak" alakulnak ki, valamint nő a koordinációs hibák száma is [26].

## 2.4. Nemkonvencionális sűrűség-hullámok

Alacsony dimenziós elektron rendszerekben, ahol a sáv szerkezet rendelkezik egy speciális illeszkedési (nesting) tulajdonsággal, sűrűség-hullám alapállapot alakulhat ki. Ennek konvencionális változatai, a spin-, és töltéssűrűség hullámok régóta ismertek és kutatottak. Az elektronok közötti kölcsönhatás szerkezetétől függően azonban megvalósulhat a nemkonvencionális változat, melyet hullámszámfüggő rendparaméter jellemez (csakúgy, mint a szupravezetők esetében). Az elméleti leírás teljességének igénye mellett a közel egy évtizede folyó ezirányú kutatásokat (melyben csoportunk a kezdetektől részt vett) az is indokolja, hogy az utóbbi években számos olyan kísérleti eredmény látott napvilágot, melyek több anyagban is nemkonvencionális sűrűség-hullám fázist valószínűsítettek. Ezek közé tartoznak a magashőmérsékletű szupravezetők az aluldópolt tartományban, valamint egyes töltésátviteli sók és nehézfémionos anyagok is.

A munka során célul tűztük ki, hogy a nemkonvencionális sűrűség-hullám fázis korábban általunk kidolgozott elméleti alapjaira építve több kísérleti érdeklődésre is számot tartó fizikai mennyiséget meghatározzunk, és jóslatainkat minél több anyag esetében összevessük az elérhető mérési eredményekkel. A felvetődő kérdések megválaszolásához általában egy alkalmasan választott átlagtér elmélet keretén belül a hőmérsékleti Green függvény technikát alkalmaztuk.

Elsősorban mérési eredmények motiválták a nemkonvencionális sűrűség-hullámokban észlelhető mágneses tértől függő termoelektromos erőre, és a

termoelektromos tenzor nemdiagonális komponensére, a Nernst effektusra irányuló vizsgálatainkat. A hullámszámfüggő rendparaméter  $\mathbf{k}$ -térbeli zérushelyei környezetében megjelenő alacsony energiás kvázirészecskék (tömeg nélküli Dirac-fermionok) energiájának Landau kvantálásán alapuló elméletünk alapján sikerült értelmezni a fenti mennyiségek mért hőmérséklet és mágneses tér függését (beleértve a tér irányát is) egy  $\alpha$ -ET sóban [1,4,6], egy TMTSF sóban [5], az LSCO és a BSCO magashőmérsékletű szupravezetőkben [8], valamint a  $\text{CeCoIn}_5$  nehézfermionos anyagban [12,13]. A Landau kvantálásra épülő eredményeinket egy minireview publikációban is összefoglaltuk [3].

A  $(\text{TaSe}_4)_2\text{I}$  töltéssűrűség-hullám anyag normál állapotában tapasztalható pszeudogap viselkedést egy konvencionális, és egy nemkonvencionális komponenssel is rendelkező rendparaméter segítségével értelmeztük. A rendszer termodinamikájának leírása mellett kiszámítottuk a spin szuszceptibilitást és a spin-rács relaxációs rátát, melyek a mérésekkel kvalitatív egyezésben vannak [18].

Kidolgoztuk az elektronokon történő Raman szórás elméletét kvázi-egydimenziós nemkonvencionális sűrűség-hullámokban. Megállapítottuk, hogy a különböző szórási geometriákban fölvetett spektrumokból egyértelmű következtetést vonhatunk le a gap szimmetriáját illetően [2]. Kiderült, hogy a kondenzátum kollektív amplitúdó módusa az alacsony energiás gerjesztésekbe bomlás lehetősége miatt túlszillapított, és csak a fény láncirányú polarizációja esetén játszik szerepet [9].

Megvizsgáltuk, hogy hogyan befolyásolja a nemkonvencionális sűrűség-hullámok viselkedését az a gyakorlatban igen fontos körülmény, ha a sáv szerkezet fentebb említett speciális illeszkedési (nesting) tulajdonsága nem tökéletes. Meghatároztuk a rendszer termodinamikáját, és jóslást adtunk a frekvenciafüggő vezetőképességre is [11].

Lefektettük a nemkonvencionális sűrűség-hullámok elméletének alapjait abban az esetben is, amikor az átalakulást nem az elektron-elektron kölcsönhatás, hanem az elektron-fonon kölcsönhatás hajtja. Rávilágítottunk arra, hogy ezesetben a rendparaméter hullámszám függése követi az elektron-fonon csatolását, kiszámítottuk a frekvenciafüggő vezetőképességet, és észleltük, hogy (a konvencionális esettel ellentétben) a kondenzátum effektív tömegének hőmérséklet függése nem monoton [10,17,22].

Tanulmányoztuk a szennyezők következtében fellépő jelenségeket is. A kvázi-egydimenziós nemkonvencionális sűrűség-hullám rendszer és egy nem mágneses szennyező kölcsönhatását vizsgálva kiszámítottuk a szennyezőtől

való távolság függvényében a lokális állapotsűrűséget és a Friedel-oszcilláció tulajdonságait, melyek alkalmasak lehetnek ennek a fázisnak pásztázó alagút-mikroszkóp segítségével történő azonosítására [21]. Megvizsgáltuk továbbá makroszkópikus mennyiségű szennyező hatását a rendszer termodinamikájára és állapotsűrűségére tetszőleges szórási amplitúdó esetén. Ellentétben a gyenge és erős szórás sokat vizsgált határesetekkel azt találtuk, hogy általános esetben sérül a rendszer elektron-lyuk szimmetriája [23]. A mágneses szennyezők és a nemkonvencionális spinsűrűség-hullám kölcsönhatásának vizsgálata arra a figyelemreméltó eredményre vezetett, hogy a csatolás megnöveli a kondenzátum rendparaméterét [24,25]. Ez az effektus állhat a nikkellel adalékolt NBCO magashőmérsékletű szupravezetőben észlelt pszeudogap növekedés hátterében.

Végezetül megjegyezzük, hogy bár nem tartozik szorosan ennek az alfejezetnek a témakörébe, de Ványolos András ösztöndíján keresztül ennek a pályázatnak a támogatásával készült a [20] publikáció, melyben a  $\text{LiCu}_2\text{O}_2$  helimágnes mért magnon spektrumát sikerült nagy pontossággal modellezni.

Az ebben az alfejezetben leírt eredmények tovább erősítették azt a meggyőződésünket, hogy számos egyéb anyagban is joggal valószínűsíthető ezeknek az egzotikus nemkonvencionális kondenzátumoknak a megjelenése fázisdiagrammjuk egyes tartományaiban. Így az ilyen irányú kutatásokat a továbbiakban hosszabb távon is gyümölcsözőnek véljük.

### 3. Kiegészítő információk

A jelen beszámoló tárgyául szolgáló témák alapkutatás jellegűek, eredményeik elsősorban referált nemzetközi folyóiratokban megjelent publikációkban testesülnek meg. Ezen 26 publikáció között szerepel egy Phys. Rev. Lett., nyolc Phys. Rev. B, egy New J. Phys., két J. Chem. Phys., két J. Magn. Res. és egy Europhys. Lett. cikk, így a publikációk össz. impakt faktora 59.

Budapest, 2007. március 30.

Virosztek Attila